

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi\alpha_0\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (4)$$

и

$$\tilde{n}(\omega) = \sqrt{\tilde{\epsilon}(\omega)}. \quad (5)$$

В двухосцилляторной модели [6] коэффициент отражения вычисляется по формуле (1) путем замены в формуле (5) $\tilde{\epsilon}(\omega)$ на

модель (рис. 3 и 4). Оцененные параметры приведены в таблицах 1 и 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проанализированы спектры отражения нанокристаллов **GaN** и **CuInSe₂** с помощью одно- и двухосцилляторной моделей с учетом “мертвого” слоя. Из сравнения экспериментальных и расчетных контуров спектров отражения определены значения энергии экситонного

Таблица 2

Параметры, определенные из сравнения расчетных и измеренных спектров отражения в области свободных **A**- и **B**-экситонов

CuInSe₂ при **T=4.2 K**

	A -экситон	B -экситон
Резонансная энергия	E=1.04104 eV	E=1.04455 eV
Параметр затухания	Γ=0.91 meV	Γ=0.74 meV
Толщина мертвого слоя	d=7.83 nm	d=8.46 nm
Поляризуемость	4πα=0.0033	4πα=0.0027

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi\alpha_{0A}\omega_{0A}^2}{\omega_{0A}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_A} + \frac{4\pi\alpha_{0B}\omega_{0B}^2}{\omega_{0B}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_B}, \quad (6)$$

где индексы **A** и **B** относятся соответственно к **A**- и **B**-экситонам.

2. ФИТИНГ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Для фитинга использовалась целевая функция вида

$$F = \sum_{i=1}^N \left(R_{теор_i} - R_{эксп_i} \right)^2, \quad (7)$$

где **N** – число экспериментальных точек, **R_{теор_i}** и

R_{эксп_i} – теоретические и экспериментальные значения коэффициента отражения [6].

Для минимизации функции **F** использовался метод квадратичной интерполяции–экстраполяции [7].

Ниже приведены экспериментальные (сплошная кривая) и рассчитанные (штриховая кривая) контуры полосы экситонного отражения **GaN** и **CuInSe₂**, а также параметры, полученные из фитинга. Для **GaN** применялась двухосцилляторная модель (рис. 2), а для **CuInSe₂** – одноосцилляторная

резонанса, параметра затухания, толщины “мертвого” слоя и поляризуемости.

Авторы благодарят канд. физ.-мат. наук Ю. П. Раковича и А. В. Мудрого за предоставленные спектры отражения **GaN** и **CuInSe₂**.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. Москва. - 1970.
2. J. J. Hopfield, D. Thomas. Theoretical and Experimental Effects of Spatial Dispersion on the optical Properties of Crystals/ Phys. Rev., 32. – 1963. - 563–572.
3. Экситоны. Под ред. Э. И. Рашба, Москва. - 1985.
4. В. А. Киселев, Б. В. Новиков, А. Е. Чередниченко. Экситонная спектроскопия приповерхностной области полупроводников. Ленинград. - 1987.
5. Ю. П. Ракович. Экситонное отражение монокристаллов **ZnSe** с учетом влияния поверхностного электрического поля/ ЖПС. 1999. Т. 66. - №3.
6. Yu. Rakovich, N.P. Tarasjuk, A.A. Gladyschuk, E.V. Lucenko, G.P. Yablonskii, M. Heuken, K. Heime. Computer modeling the Excitonic Reflection and Photoluminescence Spectra of GaN Epitaxial Layers. International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence, Brest, 1999, pp. 204–209.
7. Ю.П. Боглаев. Вычислительная математика и программирование, Москва. – 1990.

УДК 536.413

Кушнер Т.Л.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ И СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ **CuIn₃Se₅**

ВВЕДЕНИЕ

Развитие полупроводниковой электроники и микроэлектроники непосредственно связано с поиском и исследованием новых материалов, позволяющих расширить и дополнить спектр свойств уже освоенных материалов. В последнее время все возрастающее внимание привлекают сложные полупроводниковые соединения со структурой халькопирита. К

ним относятся соединения **A¹B³C⁶**, где **A¹**- **Cu, Ag; B³**- **Al, Ga, In; C⁶**- **S, Se, Te**, которые являются электрохимическими аналогами соединений **A²B⁶**. Это перспективные материалы для оптоэлектроники, нелинейной оптики, светоизлучающей техники и солнечной энергетики. На основе таких соединений могут быть реализованы светоизлучающие инжекционные приборы, фотодетекторы видимого и инфра-

Кушнер Т.Л. Ассистент каф. физики Брестского государственного технического университета.
Беларусь, БГТУ, 224017, г. Брест, ул. Московская 267.

красного диапазонов, солнечные элементы, полупроводниковые переключатели и другие устройства. В связи с этим предъявляются высокие требования к качеству и степени совершенства используемых кристаллов. Соединение CuIn_3Se_5 является малоизученным веществом, что связано, вероятно, с трудностями выращивания качественных кристаллов. В данной работе приводятся температурные условия синтеза и выращивания кристаллов CuIn_3Se_5 , а также результаты исследования его структуры.

температуре 500 К в течение приблизительно 10 часов. Угловые положения линий дифракционного спектра измеряли на рентгеновском дифрактометре в монохроматизированном $\text{Cu } K\alpha$ излучении в температурной вакуумной камере. При этом исследовались от 7 до 11 различных независимых рефлексов. Вид спектра дифракции рентгеновских лучей, полученной на порошковом образце CuIn_3Se_5 при комнатной температуре на аппарате ДРОН-3 приведен на рисунке 1.

На основании измерений угловых положений различных

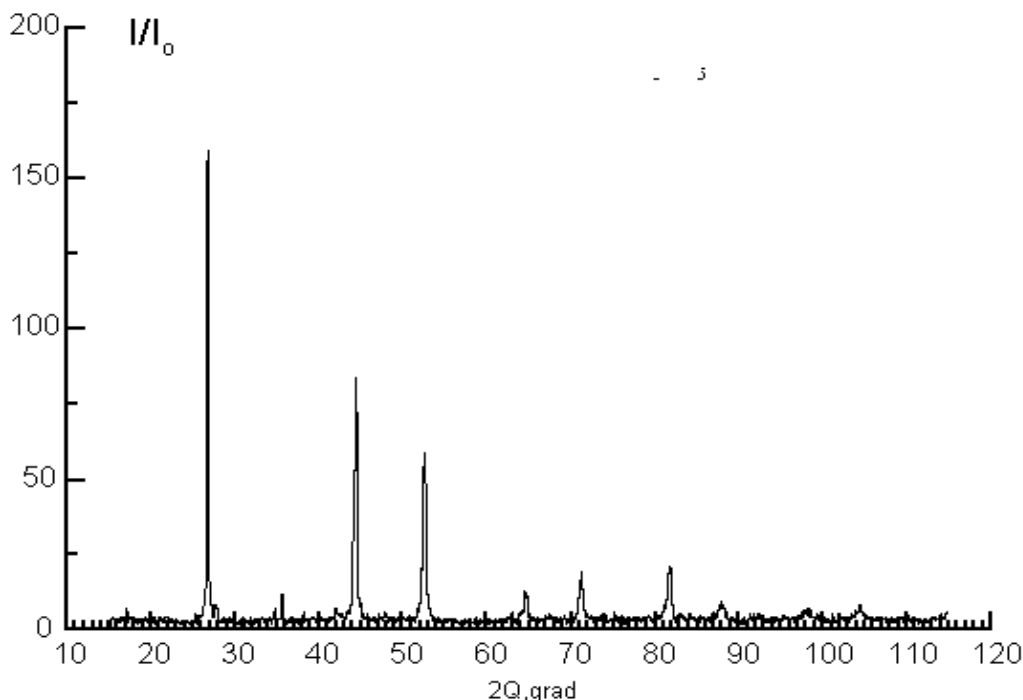


Рисунок 1. Спектр дифракции рентгеновских лучей соединения CuIn_3Se_5

СИНТЕЗ И ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ CuIn_3Se_5

Исходные элементы - медь (марки ВЗ), индий и селен (марки В4) загружали в двойные кварцевые ампулы, которые предварительно проходили химико-термическую обработку (травление в смеси кислот $\text{HNO}_3:\text{HCl}=1:3$, промывка в дистиллированной воде и отжиг в вакууме при 1270 К). Снизу к ампуле приваривали кварцевый стержень для присоединения его к вибратору. Откачанную до 10^{-3} Па и запаившую ампулу помещали в однозонную вертикальную печь, температуру в которой повышали со скоростью 50 К/ч до 1270-1290 К, выдерживали в течение 2 ч с включением вибрационного перемешивания расплава. После этого вибрацию отключали и проводили направленную кристаллизацию расплава путем понижения температуры печи со скоростью 2-3 К/ч. Выращенные в таких условиях монокристаллы имели диаметр 12 мм и длину 40 мм. Состав полученных кристаллов соединения CuIn_3Se_5 устанавливали с помощью химического и рентгеновского анализов. Согласно данным химического анализа состав выращенных монокристаллов соответствует формульному.

РЕНТГЕНОВСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ СОЕДИНЕНИЯ CuIn_3Se_5

Измерения проводились на порошковых образцах, приготовленных из выращенных вышеописанным методом монокристаллов соединения CuIn_3Se_5 . Порошок запрессовывали в кювету и отжигали для снятия напряжений в вакууме при

дифракционных линий по формуле Вульфа-Брэггов определялись межплоскостные расстояния исследуемых плоскостей отражений, по которым методом Когена с использованием метода наименьших квадратов находили параметры элементарной ячейки a и c путем решения систем двух уравнений, составленных для различных комбинаций рефлексов с различными индексами Миллера. Параметры элементарной ячейки a и c определены для комнатной температуры по ниже приведенным формулам:

$$\frac{1}{a^2} \sum A_i^2 + \frac{1}{c^2} \sum A_i B_i = \sum A_i \frac{1}{d_i^2}$$

$$\frac{1}{a^2} \sum A_i B_i + \frac{1}{c^2} \sum B_i^2 = \sum B_i \frac{1}{d_i^2},$$

где $A_i = h^2 + k^2$, $B_i = l^2$.

Рентгеновские исследования показали, что CuIn_3Se_5 кристаллизуется в тетрагональную структуру типа халькопирита с параметрами элементарной ячейки при комнатной температуре $a = 0,57557$ нм и $c = 1,1514$ нм. Данные результаты рентгенографических исследований близки к величинам, приведенным в [1] и [2].

Структура халькопирита может быть получена из структуры сфалерита заменой двух атомов второй группы атомами первой и третьей групп в катионной подрешетке. В результате каждый из катионов A и B тетраэдрически окружены атомами C , а в тетраэдрическое окружение атома C входит по

два катиона **A** и **B**. При хаотическом распределении катионов **A** и **B** в катионной подрешетке образуется структура сфалерита, в случае их упорядочения, возникает структура халькопирита. Следствием упорядочения катионов **A** и **B** является возникновение тетрагонального искажения. Элементарная ячейка халькопирита имеет удвоенный по сравнению с кубической решеткой сфалерита параметр решетки вдоль оси **c**. В идеальной тетрагональной ячейке халькопирита осевое отношение **c/a** равно 2. Однако из-за различия размеров двух типов катионов в кристалле возникают два типа анионных тетраэдров, центрированных катионами большего и меньшего размеров. В результате кристаллическая решетка трехкомпонентных соединений $A^1B^3C^6$ приобретает дополнительное тетрагональное искажение, определяемое параметром $\delta=2-(c/a)$. В нашем случае тетрагональное искажение кристаллической решетки соединения $CuIn_3Se_5$ $\delta=0,005$.

ВЫВОДЫ

Методом направленной кристаллизации расплава выращены монокристаллы $CuIn_3Se_5$. Согласно данным химического анализа состав выращенных монокристаллов соответствует формульному. При помощи рентгеноструктурных ис-

следований определены параметры кристаллической решетки соединения $CuIn_3Se_5$. Установлено, что $CuIn_3Se_5$ кристаллизуется в тетрагональную структуру типа халькопирита с параметрами элементарной ячейки $a=0,57557$ нм и $c=1,1514$ нм при комнатной температуре.

Искренне благодарю заведующего кафедрой химии Белорусского государственного университета информатики и электроники, доктора химических наук Боднаря И.В., за доверие самостоятельно представить результаты исследований, старшего научного сотрудника Института физики твердого тела и полупроводников АН Республики Беларусь, кандидата физико-математических наук Орлову Н.С. – за помощь в проведении измерений, заведующего кафедрой физики Брестского государственного технического университета, кандидата физико-математических наук Гладышука А.А. – за понимание и поддержку.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Marin G., Tauligne S., Guevara R., Delgado J.M. et.al. Inst. Phys. Conf. Ser. N 152, Sect. D. 1997. Proc. 11th ICTMC-11. P.573-577.
2. Honle W., Kuhn G., Boence U.-C. Cryst. Res. Technol. 1988. V.23. P.1347-1354.

УДК 535.337

Ракович Ю.П., Смаль А.С.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ СВОБОДНЫХ ЭКСИТОНОВ И ПОЛЯРИТОНОВ С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

Для эффективного развития технологии оптоэлектронных устройств на основе монокристаллов A_2B_6 требуется точное знание оптических параметров свободных экситонов и в первую очередь надежное определение резонансной частоты в широком интервале температур. Коэффициент поглощения монокристаллов A_2B_6 в области экситонного резонанса достигает 10^4-10^5 см⁻¹ [1] и для прямого определения экситонных параметров из спектров поглощения требуются тонкие монокристаллические пленки высокого качества, выращивание которых сопряжено со значительными трудностями. Поэтому чаще всего для изучения энергетической структуры полупроводниковых кристаллов используют анализ их спектров отражения, которые сильно зависят от состояния поверхности и в ряде случаев обнаруживают аномалии в виде дополнительных пиков [2,3]. В такой ситуации подходы, когда для оценки резонансной энергии E_0 свободных экситонов оперируют просто положением минимумов или максимумов спектров экситонного отражения (ЭО) [4,5], или же выбирают E_0 посередине экспериментально измеренного контура $R(E)$ [6,7], не могут обеспечить достаточной точности. Нельзя считать надежным и определение спектрального положения экситонного резонанса из расчета мнимой части диэлектрической постоянной с помощью классических соотношений Крамерса-Кронига [8], так как есть основания полагать, что в области экситонного резонанса они не выполняются [9].

Для анализа спектров монокристаллов A_2B_6 в области экситонного резонанса наибольшее распространение получил

метод подгонки вычисляемых по формулам Френеля кривых ЭО к экспериментальным спектрам [3,10]. Таким методом можно оценить все основные параметры свободных экситонов: затухание Γ , фоновую диэлектрическую проницаемость ϵ , резонансную энергию экситонного осциллятора, поляризуемость $4\pi\alpha$ (либо продольно-поперечное расщепление Δ_{LT}), проследить их изменение под влиянием различных внешних воздействий. Влияние поверхности можно учесть введением приповерхностного безэкситонного («мертвого») слоя [11], наличие которого приводит к интерференционным эффектам [3,12] и трансформации контура полосы отражения. Электрические поля поверхностных состояний или дефектов могут вызвать значительное увеличение глубины мертвого слоя d [3,11], а температурная перезарядка дефектов – изменение величины d с температурой.

Несмотря на то, что в ряде случаев такой подход не дает удовлетворительного согласия с экспериментом [2], модель мертвого слоя до сих пор остается чрезвычайно популярной, так как позволяет довольно просто рассчитывать спектры ЭО. Для объяснения многообразия спектров отражения были предложены также несколько моделей, основанных на линейной [12] или экспоненциальной [13] зависимости резонансной энергии экситона от координаты $z < d$, которые постулировались, исходя из возможности аналитического рассмотрения. Однако при этом природа «мертвого» слоя и его связь с приповерхностной областью пространственного заряда (ОПЗ) оставалась не выясненной.

Ракович Юрий Петрович. К. ф.-м. н., доцент каф. физики Брестского государственного технического университета.

Смаль Александр Сергеевич. Старший преподаватель каф. АТПиП Брестского государственного технического университета.

Беларусь, БГТУ, 224017, г. Брест, ул. Московская 267.

Физика, математика, химия